



TITLE:

細胞選別-ランダムウォークの等価性 と生体内の1次元確率過程 (第8回 生物数学の理論とその応用)

AUTHOR(S):

南, 和彦

CITATION:

南, 和彦. 細胞選別-ランダムウォークの等価性と生体内の1次元確率過程 (第8回生物数学の理論とその応用). 数理解析研究所講究録 2012, 1796: 72-80

ISSUE DATE:

2012-06

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/172908>

RIGHT:

細胞選別-ランダムウォークの等価性と生体内の 1 次元確率過程
Equivalence between cell-sorting and random walk,
and their relations to
one-dimensional stochastic processes in organisms.

南 和彦 (Kazuhiko Minami)
名古屋大学・院・多元数理科学研究科
Grad. School of Math., Nagoya Univ.
e-mail: minami@math.nagoya-u.ac.jp

1 序章

生物系の数理モデルとしての格子模型は、しばしばスピン格子模型つまり磁性体の数理モデルと等価になる。スピン格子模型は統計力学の研究対象として古くから調べられており [1][2]、近似手法や数値計算上の技術に関して多くの蓄積があり、いくつかの模型については自由エネルギーや相関関数などが解析的に得られている。またその数理構造はしばしば純粋数学としての研究対象になっている。

2009 年 11 月に行われた RIMS 研究集会「第 6 回生物数学の理論とその応用」において、生物の数理モデルとスピン格子模型との等価性を考え、スピン系で得られている種々の結果、特に模型の等価性を經由して、一見全く異なる生物系の数理モデルが、実は共通の数理構造に支配される場合があるのではないか、ということを述べた。この論文の第 2 章と第 3 章はその考究録「格子模型の厳密解と生態系」[3] の内容を短く要約したものであり、2 次元の細胞選別の数理モデルと 1 次元のある種のランダムウォークとの等価性が述べられている。さらに今回の講演に対応して、第 4 章と第 5 章では、mRNA 上のリボゾームの運動をスピン演算子で書き、同種のランダムウォークに強く関連する事を述べ、またキネシンの確率過程をスピン演算子で書き下した。

2 格子模型

スピンは量子力学的な角運動量であり、以下の交換関係によってその性質が定められる：

$$[s_i^x, s_i^y] = is_i^z, \quad [s_i^y, s_i^z] = is_i^x, \quad [s_i^z, s_i^x] = is_i^y. \quad (1)$$

ここで s_i^x, s_i^y, s_i^z はサイト i 上にあるスピンの、それぞれ x, y, z 成分に対応する演算子である。スピンの大きさが $1/2$ の場合、 s_i^z の固有状態は $|+\rangle$ と $|-\rangle$ の 2 つあり、これらをそれぞれスピン

up と down の状態とよぶことにする（スピンの大きさが S の場合には、状態の数は $n = 2S + 1$ ある）。これらの状態にスピン演算子を作用させると、 $s_i^z|+\rangle = +\frac{1}{2}|+\rangle$ 、 $s_i^z|-\rangle = -\frac{1}{2}|-\rangle$ 、また $s_i^\pm = s_i^x \pm is_i^y$ として $s_i^\pm|\mp\rangle = |\pm\rangle$ 、 $s_i^\pm|\pm\rangle = 0$ となることが交換関係から導かれる。

スピン格子模型においては、相異なるサイト上のスピンが互いに相互作用する。最も代表的なスピン模型である XXZ 模型のハミルトニアン H は：

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} (s_i^x s_j^x + s_i^y s_j^y + \Delta s_i^z s_j^z) - h \sum_i s_i^z \quad (2)$$

ここで和は相互作用するすべての spin pair についてとる。特に $\Delta = 1$ の場合を Heisenberg 模型とよぶ。ハミルトニアン H において $s_i^x s_j^x + s_i^y s_j^y = (s_i^+ s_j^- + s_i^- s_j^+)/2$ であり、これは相互作用する2つのスピンをどちらも反転させる2体の flip の演算子で、up を粒子 down を空白とみなすと、粒子の左右への移動を生成する演算子であるとみなすことができる。格子模型の相互作用としてこれだけを考えるものを XY 模型とよぶ。さらに一般には γ を定数として $(1+\gamma)s_i^x s_j^x + (1-\gamma)s_i^y s_j^y$ として、相互作用の異方性を導入する。異方性から生じる項は $\gamma s_i^x s_j^x - \gamma s_i^y s_j^y = \gamma(s_i^+ s_j^+ + s_i^- s_j^-)/2$ であり、これは粒子の対生成と対消滅に対応する。ハミルトニアン H の次の項 $s_i^z s_j^z$ からは、相互作用する2つのサイトの状態の固有値 $\pm 1/2$ の積が現れ、この部分を Ising 相互作用とよぶ。格子模型の相互作用としてこの Ising 相互作用だけを考えるものを Ising 模型とよぶ。1次元の XY 模型および1次元と2次元の Ising 模型については、自由エネルギーの解析的な表式が得られている [4]-[9]。

これらの模型の間には等価性が存在することが知られている [10]。Ising 模型は伝送行列とよばれる行列を導入し、厳密解を得ることを伝送行列の最大固有値を求めることに帰着して解かれる。このとき2次元 Ising 模型の伝送行列 V と1次元 XY 模型のハミルトニアン H とが、パラメータの適当な関係の下で可換になる： $[H, V] = HV - VH = 0$ 。したがって両者は同時対角化可能で共通の固有状態 ϕ をとることができる。特に伝送行列 V の最大固有値に対応する固有状態と、ハミルトニアン H の基底状態とが一致する。これら2つの模型の物理量は、この共通の ϕ を通じて計算され、例えば両者の相関関数の間には

$$\langle s_{ij}^z s_{ik}^z \rangle_{2D \text{ Ising}} = \cosh^2 K_1^* \langle s_j^x s_k^x \rangle_{1D \text{ XY}} - \sinh^2 K_1^* \langle s_j^y s_k^y \rangle_{1D \text{ XY}} \quad (3)$$

の関係がある。ここで J_1 と J_2 は2次元 Ising 模型の縦方向と横方向の相互作用定数、 $\beta = 1/k_B T$ として $K_1 = \beta J_1$ 、 $K_2 = \beta J_2$ 、パラメータの間には $\exp(-2K_i) = \tanh K_i^*$ として $\cosh 2K_1^* = 1/\gamma$ かつ $\tanh 2K_2 = (1 - \gamma^2)^{1/2}/h$ の関係がある。

3 細胞選別の数理モデルと Ising 模型

細胞選別とは異なる組織に由来する例えば2種類の細胞を混ぜて培養したとき、適当な条件下で細胞塊が形成される現象である。そのメカニズムについては、細胞間の接着力による自由エネルギーの最小化過程であるという仮説が1960年代を中心とする Steinberg の一連の論文 [11]-[15]

で提案されており、これを確かめるために様々な数理モデルでの解析が行われて来た。ここでは望月-巖佐-武田 [16] によって導入されたモデルについて考える。

2次元正方格子あるいは1次元鎖の各格子点に、黒および白で区別される細胞がひとつずつ置かれているとする。黒と黒が隣接しているときの接着力を λ_{BB} 、白と白の接着力を λ_{WW} 、黒と白との接着力を λ_{BW} とする。このとき黒と白の細胞の配置（状態）に対応して接着力の合計 E が決まり、このときその状態の実現確率は m を定数として $\exp(E/m)$ に比例すると仮定する。隣り合う細胞をこの確率の下で入れ替えていき定常状態をさがすと、差次接着力を $A = \lambda_{BB} + \lambda_{WW} - 2\lambda_{BW}$ として A/m が正で大きいとき、同種の細胞が集まって細胞塊を形成することがわかる。

ここで $\lambda_{BB} = \lambda_{WW}$ としたモデルは Ising 模型と等価である。黒の細胞を up、白の細胞を down のスピンに対応させれば、隣り合うスピンが同じ向きの際の相互作用のエネルギーは $-J/4$ 、隣り合うスピンが反対向きの際の相互作用のエネルギーは $+J/4$ であるので、エネルギーの原点を適当に決めて、これらの2つの模型の間に自明な対応をつけることができる。確率 $\exp(E/m)$ は Boltzmann 因子に対応し、細胞塊が形成されることは磁区が形成されることに対応する。

このとき2次元の細胞選別に関する種々の量は2次元 Ising 模型における種々の物理量に対応し、したがって上記の等価性を通じて1次元 XY 模型の物理量で表され、そして1次元 XY 模型は既に述べたように、ある種のランダムウォークを生成する。例えば、ある細胞が黒であるときその隣の細胞が黒である確率 q_{BB} は、2次元 Ising 模型の相関関数を用いて、さらに1次元 XY 模型の相関関数を用いて次のように書ける：

$$\begin{aligned} \rho_B q_{BB} &= \langle s_{ij}^z s_{ik}^z \rangle_{2D\text{Ising}} + \frac{1}{4} + \langle s_i^z \rangle_{2D\text{Ising}} \\ &= \cosh^2 K_1^* \langle s_j^x s_k^x \rangle_{1D\text{XY}} - \sinh^2 K_1^* \langle s_j^y s_k^y \rangle_{1D\text{XY}} + \frac{1}{4} + \left(\rho_B - \frac{1}{2}\right) \end{aligned} \quad (4)$$

ただしここで ρ_B は黒の存在比である。^{*1}これらの相関関数はスピン格子模型の問題として詳しく調べられ、種々の解析的な表式が得られている [17]-[20]。

4 ランダムウォークの遷移行列

さらに1次元で対生成と対消滅のあるランダムウォークについて、その遷移行列の最も一般的な表式を示し、mRNA 上のリボゾームの運動との関係について議論したい。次の演算子を考えよう

$$H = \sum_{j=1}^N \begin{bmatrix} w_3 & p_U & 0 & 0 \\ p_D & w_4 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & w_1 & p_L \\ 0 & 0 & p_R & w_2 \end{bmatrix}_{jj+1} \quad (5)$$

^{*1} [3] の (3) 式は間違いでこちらが正しい

ここで、各行列成分は以下の遷移に対応する:

$$\begin{aligned}
 p_D : |+\rangle_j |+\rangle_{j+1} &\mapsto |-\rangle_j |-\rangle_{j+1}, & w_3 : |+\rangle_j |+\rangle_{j+1} &\mapsto |+\rangle_j |+\rangle_{j+1} \\
 p_U : |-\rangle_j |-\rangle_{j+1} &\mapsto |+\rangle_j |+\rangle_{j+1}, & w_4 : |-\rangle_j |-\rangle_{j+1} &\mapsto |-\rangle_j |-\rangle_{j+1} \\
 p_R : |+\rangle_j |-\rangle_{j+1} &\mapsto |-\rangle_j |+\rangle_{j+1}, & w_1 : |+\rangle_j |-\rangle_{j+1} &\mapsto |+\rangle_j |-\rangle_{j+1} \\
 p_L : |-\rangle_j |+\rangle_{j+1} &\mapsto |+\rangle_j |-\rangle_{j+1}, & w_2 : |-\rangle_j |+\rangle_{j+1} &\mapsto |-\rangle_j |+\rangle_{j+1}.
 \end{aligned}$$

つまり p_D は対消滅、 p_D は対生成、 p_R は右への移動、 p_L は左への移動の確率であり、各 w_i はそれぞれの状態が変化しない確率である。

まず、周期的境界条件を仮定し、 $w_i = 0$ ($i = 1, 2, 3, 4$) のとき、つまり状態が必ず変化する場合について考えよう。状態 $|+\rangle_1 |+\rangle_2 \cdots |+\rangle_N = |++++\rangle$ から出発するとき、対消滅は N 個のペアについて可能で、 $|---++\cdots+\rangle$ 、 $|+---+\cdots+\rangle$ のように連続した2つの格子点が空白である状態が生成される。このとき、遷移の確率の合計は1なので、確率の保存より $Np_D = 1$ が要請される。次に既に空白のある状態、例えば $|+-++\cdots+\rangle$ 、 $|+---+\cdots+\rangle$ 、 $|+-+-\cdots+\rangle$ 、etc. について考えよう。このとき確率の和のなかで、2つの p_D (あるいは2つの p_U) が常に p_R と p_L のペアに置き換えられるので、確率の保存則より $2p_D = p_R + p_L$ (および $2p_U = p_R + p_L$)、また p_D の場合と同様にして $Np_U = 1$ であることがわかり、結局、 $p_D = p_U = 1/N$ 、 $p_R + p_L = 2/N$ が得られる。

状態が不変である確率 w_i ($i = 1, 2, 3, 4$) が0でないとき、 p_D 、 p_U 、 p_R 、 p_L はそれぞれ $p_D + w_3$ 、 $p_U + w_4$ 、 $p_R + w_1$ 、 $p_L + w_2$ で置き換えられるので、確率の保存は

$$p_D + w_3 = p_U + w_4 = \frac{1}{N}, \quad (6)$$

$$(p_R + w_1) + (p_L + w_2) = \frac{2}{N}. \quad (7)$$

開放端の場合は $s_{N+1}^z \neq s_1^z$ であり、スピン対 $(j, j+1)$ の数は N なので、サイトの数を $N+1$ として条件 (6) はそのまま正しい。条件 (7) は $2 \leq j \leq N-1$ に対してそのまま要請され、両端 $(j, j+1) = (1, 2)$ と $(N, N+1)$ についての確率の保存は

$$p_R + w_1 = p_L + w_2 = \frac{1}{N}. \quad (8)$$

となる。条件 (7) は (8) を仮定するとみたされるので、結局 (6) と (8) が開放端において確率が保存するための条件である。

演算子 (5) をスピン演算子で書くと

$$\begin{aligned}
 H = \sum_{j=1}^N [&p_R s_j^- s_{j+1}^+ + p_L s_j^+ s_{j+1}^- + p_U s_j^+ s_{j+1}^+ + p_D s_j^- s_{j+1}^- \\
 &+ \Delta s_j^z s_{j+1}^z - \frac{h}{2} (s_j^z + s_{j+1}^z) + c_0 I + \frac{c}{2} (s_j^z - s_{j+1}^z)], \quad (9)
 \end{aligned}$$

ここで I は単位行列であり、各係数は

$$\begin{aligned}
 \Delta &= w_3 + w_4 - w_1 - w_2, & h &= w_4 - w_3 \\
 c_0 &= \frac{1}{4} (w_3 + w_4 + w_1 + w_2), & c &= w_1 - w_2
 \end{aligned} \quad (10)$$

をみたす。周期的境界条件 $s_{N+1}^z = s_1^z$ の場合には (9) 式の最後の項は $\sum_{j=1}^N (s_j^z - s_{j+1}^z) = 0$ によって消え、 H は c に依存しない。 w_3, w_4 と $w_1 + w_2$ は c に依存せず、したがって H は c を自由なパラメータとして (6) と (7) をみたす確率行列となる。これは並進対称性からの帰結である。1 体の生成および消滅に対応する演算子も同様にスピン演算子で表される。これが対生成と対消滅を含む 1 次元ランダムウォークの最も一般的な表式である。この運動においては各格子点の状態は up と down の 2 通りに限られるため、1 つの格子点に存在できる粒子の数は 1 つまでであり、いわゆるハードコア相互作用をする粒子のランダムウォークになっている。

ハードコア相互作用の単純なランダムウォーク: 対生成と対消滅がなく、粒子が必ず移動する最も単純なランダムウォークについて考える。(5) 式、(6) 式、(8) 式より、このランダムウォークの遷移行列は以下ようになる

$$H_{\text{RW}} = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \eta_L \\ 0 & 0 & \eta_R & 0 \end{bmatrix}_{jj+1}, \quad (11)$$

ただし $\eta_R/N = p_R$ 、 $\eta_L/N = p_L$ 、 $\eta_R + \eta_L = 2$ である。この行列をスピン演算子で書くと

$$H_{\text{RW}} = \frac{2}{N} \sum_{j=1}^N \left[\frac{1}{2} (\eta_R s_j^- s_{j+1}^+ + \eta_L s_j^+ s_{j+1}^-) + s_j^z s_{j+1}^z + \frac{1}{4} I \right]. \quad (12)$$

$\eta_R = \eta_L = 1$ であるとき、(12) は XXZ 模型 (2) のハミルトニアンにおいて $\Delta = 1$ かつ $h = 0$ としたもの、つまり磁場のない場合の Heisenberg 模型になっている。これはヘリウムの超流動に関連して松原と松田によって導入されたハードコアボゾン系 [21] に他ならない。

$\eta_R \neq \eta_L$ のとき、 $\eta_R \eta_L \neq 0$ の条件の下でこの異方性は除去できる [22]。

$$V = \exp[(\log q) \sum_{j=1}^N j n_j], \quad n_j = \frac{1}{2} + s_j^z \quad (13)$$

としよう。交換関係 $[n_j, s_j^\pm] = \pm s_j^\pm$ と展開式

$$e^L A e^{-L} = A + \frac{1}{1!} [L, A] + \frac{1}{2!} [L, [L, A]] + \frac{1}{3!} [L, [L, [L, A]]] + \cdots,$$

を用いると $V s_j^\pm V^{-1} = q^{\pm j} s_j^\pm$ および $V s_j^z V^{-1} = s_j^z$ が得られる。 $q = \sqrt{\eta_L/\eta_R}$ とすると

$$\begin{aligned} V H_{\text{RW}} V^{-1} &= V \left[\frac{2}{N} \sum_{j=1}^N \left[\frac{\sqrt{\eta_R \eta_L}}{2} (q^{-1} s_j^- s_{j+1}^+ + q s_j^+ s_{j+1}^-) + s_j^z s_{j+1}^z + \frac{1}{4} I \right] \right] V^{-1} \\ &= \frac{2}{N} \sqrt{\eta_R \eta_L} \sum_{j=1}^N \left[\frac{1}{2} (s_j^- s_{j+1}^+ + s_j^+ s_{j+1}^-) + (s_j^z s_{j+1}^z + \frac{1}{4} I) / \sqrt{\eta_R \eta_L} \right]. \end{aligned}$$

したがって、ランダムウォークにおける左右の移動の非対称性は、スピン系のハミルトニアンにおける異方性 Δ に対応する。

mRNA 上を移動するリボゾーム: リボゾームは大きく複雑な分子で、mRNA 上を移動してその遺伝情報を読みながらながらアミノ酸からタンパク質を生成する。RNA は 4 種類のヌクレオチドからなり、3 つのヌクレオチドが 1 つのコドンをなす。それぞれのコドンは 1 つの種類のアミノ酸に対応し、61 種類のコドンは全体で 20 種類のアミノ酸に対応する。リボゾームはコドンの列を順に読みながら対応するアミノ酸をつないでタンパク質を生成する。

リボゾームはまず mRNA に付着し、タンパク質の合成を始める。アミノ酸をとらえ生化学的なサイクルを経てそれを接続しタンパク質を延長してから、mRNA の上をコドン 1 個分だけ移動し、再びその情報を読み取って対応するアミノ酸をとらえる。最後に終了コドンに到達すると、生成したタンパク質を放して、自らも mRNA から離れる。

1 つの mRNA 上には同時に複数のリボゾームが付着する。リボゾームは隣にリボゾームがあるときにはそこへ移動できない。つまり mRNA 上のリボゾームはハードコア相互作用によって互いに反発する。

MacDonald et al. はこのリボゾームの運動の数値モデルとして、現在では asymmetric simple exclusion process (ASEP) とよばれる 1 次元の確率過程を考えた [23][24]。このモデルはその後独立に、統計物理における非平衡系の模型として定義され、種々の厳密解が得られている (例えば [25] を参照)。

ASEP を定義しよう。これは左右への移動確率を指定した、連続時間で変化するハードコアのランダムウォークである。1 次元の格子つまり 1 次元鎖を考え、それぞれのサイト j は、粒子 (リボゾーム) があるか空白かのどちらかであるとする。それぞれの粒子はハードコア相互作用によって反発しながら確率的に右または左にすすむ。つまりサイト j にある粒子はサイト $j+1$ に粒子がなく空白であるとき p_R の割合で右に移動し、サイト $j+1$ にある粒子はサイト j に粒子がなく空白であるとき p_L の割合で左に移動する。

まず周期的境界条件の下での遷移行列 (5) を考えよう。 $p_U = p_D = 0$ であるとき (6) より $w_3 = w_4 = 1/N$ であり、 H は c に依存しないので w_1 と w_2 を

$$w_1 = \frac{1}{N}(1 - \delta) - p_R, \quad w_2 = \frac{1}{N}(1 + \delta) - p_L, \quad (c = p_L - p_R - \frac{2}{N})$$

のようにとることができる。これらは条件 (6) と (7) をみだし、対応する遷移行列は

$$\begin{aligned} H_{\text{ASEP}} &= \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & (1 - \delta) - \eta_R & \eta_L \\ 0 & 0 & \eta_R & (1 + \delta) - \eta_L \end{bmatrix}_{jj+1} \\ &= I + \Delta H_{\text{ASEP}}, \\ \Delta H_{\text{ASEP}} &= \frac{2}{N} \sum_{j=1}^N \left[\frac{1}{2}(\eta_R s_j^- s_{j+1}^+ + \eta_L s_j^+ s_{j+1}^-) + \frac{1}{2}(\eta_R + \eta_L) s_j^z s_{j+1}^z \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{8}(\eta_R + \eta_L)I + \frac{1}{4}(\eta_L - \eta_R - 2\delta)(s_j^z - s_{j+1}^z) \right]. \end{aligned} \quad (14)$$

これは離散時間の ASEP である。周期的境界条件により最後の項は消え、 H_{ASEP} は δ に依存しな

い。これは δ と $-\delta$ が和 $\sum_{j=1}^N$ の中で常にペアで現れ、最終的には確率に寄与しないからである。 $\eta_R = 1 - \delta$ 、 $\eta_L = 1 + \delta$ とおくと、系は (11) と (12) に帰着する。この場合は ASEP はハードコア相互作用の単純なランダムウォークである。特に $q^N = 1$ がみたされるとき、(13) の変換から来る境界項が消え、このとき ASEP は周期的境界条件の XXZ 模型に他ならない。

リボゾームの数理モデルとしては、移動の割合は非対称で、境界条件は開放端とするのが自然である。この場合には条件 (8) は $\delta = 0$ のときにみたされ、 H_{ASEP} はやはりスピン演算子で書かれている [26][27]。サイト $j = 1$ でリボゾームが付着し $j = N + 1$ で離れる効果はそれぞれ $\alpha_1[s_1^+ - (1 - n_1)]$ 、 $\beta_{N+1}[s_{N+1}^- - n_{N+1}]$ と書いて、変換 $V = \exp[(\log q) \sum_{j=1}^{N+1} j n_j]$ ((13) を少し変形してある) によって

$$\begin{aligned} V \Delta H_{\text{ASEP}} V^{-1} = & \frac{2}{N} \sqrt{\eta_R \eta_L} \sum_{j=1}^N [s_j^x s_{j+1}^x + s_j^y s_{j+1}^y + \frac{1}{2}(q + q^{-1}) s_j^z s_{j+1}^z - \frac{1}{8}(q + q^{-1}) I] \\ & + \frac{1}{N} \sqrt{\eta_R \eta_L} \frac{1}{2} (q - q^{-1}) (s_1^z - s_{N+1}^z) \\ & + \alpha_1 [q s_1^+ - (1 - n_1)] + \beta_{N+1} [q^{-(N+1)} s_{N+1}^- - n_{N+1}]. \end{aligned}$$

つまり開放端の ASEP は $\Delta = (q + q^{-1})/2$ の異方性をもち、境界に $h_0 = (q - q^{-1})/2$ の磁場をかけた XXZ 模型である。 $\alpha_1 = \beta_{N+1} = 0$ のときは量子群 $U_q(SU(2))$ (例えば [28] を参照) の対称性を持つスピン鎖として既によく知られているもの [29] であり、このときパラメータ $q = \sqrt{\eta_L / \eta_R}$ は、まさしく量子群の q 変形のパラメータ q に一致する。

連続時間の ASEP もまた同じ演算子 (14) によって記述される。 $P(x_1, x_2, \dots, x_{m_p}; t)$ を系が時刻 t において状態 $\{x_1, x_2, \dots, x_{m_p}\}$ にある確率としてその時間変化は

$$\frac{d}{dt} \mathbf{P}(x_1, x_2, \dots, x_{m_p}; t) = (\Delta H_{\text{ASEP}}) \mathbf{P}(x_1, x_2, \dots, x_{m_p}; t)$$

をみtas。

キネシンの運動: 一般に n 状態の何らかの生成規則があるとき、その遷移行列は必ずスピン演算子によって表され、対応するスピン系のハミルトニアンが存在することを簡単に示すことができる。ここではその一例として、キネシンの運動の数理モデルをスピン演算子で書いてみよう。

キネシンは細胞内の物質輸送を担う分子モーターで、マイクロチューブに沿って移動する。運動は確率的で、移動の仕方は離散的である。(例えば [30] を参照)。このキネシンに関する Kolomeisky と Fisher による数理モデル [31] を考えよう。

1次元格子を考え、キネシンがサイト j ($j = 1, 2, \dots, N+1$) にあるとし、 k ($k = 0, 1, 2, \dots, K-1$) をキネシンの内部状態を区別するラベルとする。キネシンはその内部状態を u_k の割合で k から $k+1$ に変更し、 w_k の割合で k から $k-1$ に変える。サイト j にあり、内部状態が $k = K-1$ のキネシンだけが u_{K-1} の割合で次のサイト $j+1$ に移動し、その内部状態を $k = 0$ に戻す。サイト $j+1$ にあり、内部状態が $k = 0$ のキネシンだけが w_0 の割合でサイト j に移動し、そのとき内部状態は $k = K-1$ になる。これは内部状態を考慮した 1 体の ASEP であるとも考えることもできる。

内部状態の数が $K = 2$ の場合の遷移行列をスピン演算子で表しておく。それぞれのサイトは、 $k = 0, 1$ そして「空白」の 3 つの状態を取り得る。そこでスピンの大きさが $S = 1$ のスピン演算子を考えると、固有値が $S^z = -1, +1, 0$ の $2S + 1 = 3$ つの固有状態が存在する。これらをそれぞれ状態 $k = 0, 1$ および「空白」に対応させよう。遷移行列を $H_{\text{KF}} = I + \Delta H_{\text{KF}}$ とし、 ΔH_{KF} について考える。サイト j における状態 $k = 0$ から $k = 1$ への遷移は

$$\begin{aligned} H_j^+ &= u_0 \left(\begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}_j - \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}_j \right) \\ &= u_0 \left[\left(\frac{1}{\sqrt{2}} s_j^+ \right)^2 - \left(I_j - \frac{1}{\sqrt{2}} s_j^+ \frac{1}{\sqrt{2}} s_j^- \right) \right] = u_0 (s_j^+ s_j^x - I_j). \end{aligned}$$

状態 $k = 1$ から 0 への遷移は同様にして $H_j^- = u_1 (s_j^- s_j^x - I_j)$ と書ける。サイト j の状態 $k = 1$ からサイト $j + 1$ の状態 $k = 0$ への遷移は

$$\begin{aligned} H_{jj+1}^+ &= u_1 \left(\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}_j \otimes \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}_{j+1} - \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}_j \otimes \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}_{j+1} \right) \\ &= u_1 \left[\left(\frac{1}{\sqrt{2}} s_j^- s_j^z \right) (s_{j+1}^z \frac{-1}{\sqrt{2}} s_{j+1}^-) - \left(I_j - \frac{1}{\sqrt{2}} s_j^- \frac{1}{\sqrt{2}} s_j^+ \right) (I_{j+1} - (s_{j+1}^z)^2) \right] \\ &= -\frac{1}{2} u_1 \left[(s_j^- s_j^z) (s_{j+1}^z s_{j+1}^-) + ((s_j^z)^2 + s_j^z) (I_{j+1} - (s_{j+1}^z)^2) \right], \end{aligned}$$

ただしここで関係式 $(s_j^x)^2 + (s_j^y)^2 + (s_j^z)^2 = S(S + 1) = 2$ と

$$I_j - \frac{1}{\sqrt{2}} s_j^+ \frac{1}{\sqrt{2}} s_j^- = \frac{1}{2} [(s_j^z)^2 \mp s_j^z].$$

を用いた。サイト $j + 1$ の状態 $k = 0$ からサイト j の状態 $k = 1$ への遷移は同様にして

$$H_{jj+1}^- = -\frac{1}{2} u_0 \left[(s_j^z s_j^+) (s_{j+1}^+ s_{j+1}^z) + (I_j - (s_j^z)^2) ((s_{j+1}^z)^2 - s_{j+1}^z) \right]$$

と表される。 ΔH_{KF} はこれらの演算子で構成され、 H_{KF} は以下のようなになる

$$H_{\text{KF}} = I + \sum_{j=1}^{N+1} (H_j^+ + H_j^-) + \sum_{j=1}^N (H_{jj+1}^+ + H_{jj+1}^-).$$

最後に最大固有値 λ_0 で規格化することで、定常状態に対応する固有値は 1 になる。

一般にはハミルトニアンは $n = 2S + 1$ をみたす大きさ S のスピンからなり、

$$H = \sum_{\langle i, j \rangle} J_{mn} (s_i^k)^m (s_j^l)^n - H^z \sum_i s_i^z - H^x \sum_i s_i^x, \quad (k, l = z, \pm) \quad (15)$$

のように複雑なものになる可能性がある。

参考文献

- [1] H.Stanley:*Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena*, Clarendon Press, Oxford, 1971 (邦訳, スタンリー: **相転移と臨界現象**, 東京図書, 1974)
- [2] D.Mattis: *The Theory of Magnetism I and II*, Springer Verlag, 1981, 1985.
- [3] 南 和彦: 京都大学数理科学研究所講究録 1704 (2010) 158
- [4] E.Ising: Zeitz. F. Physik 31 (1925) 253.
- [5] 久保亮五: 物性論研究 1 (1943) 1.
- [6] L.Onsager: Phys. Rev. 65 (1944) 117.
- [7] E.H. Lieb, T.D. Schults and D.C. Mattis: Ann. Phys. 16 (1961) 407.
- [8] S.Katsura: Phys. Rev. 127 (1962) 1508.
- [9] T.Niemaijer: Physica 36 (1967) 377.
- [10] M.Suzuki: Prog. Toer. Phys. 46 (1972) 507.
- [11] M.S. Steinberg: Proc. Nat. Acad. Sci. USA 48 (1962) 1577.
- [12] M.S. Steinberg: Science 137 (1962) 762.
- [13] M.S. Steinberg: Proc. Nat. Acad. Sci. USA 48 (1962) 1769.
- [14] M.S. Steinberg: Science 141 (1963) 401.
- [15] M.S. Steinberg: J. Exp. Zool. 173 (1970) 395.
- [16] A. Mochizuki, Y. Iwasa and Y. Takeda: J. Theor. Biol. 179 (1996) 129.
- [17] T.T. Wu, B.M. McCoy, C.A. Tracy and E. Barouch: Phys. Rev. B13 (1976) 316.
- [18] B.M. McCoy, C.A. Tracy and T.T. Wu: Phys. Rev. Lett. 38 (1977) 793.
- [19] B.M. McCoy, E. Barouch and D.B. Abraham: Phys Rev A 4(1971) 2331.
- [20] T. Tonegawa: Solid State Comm. 40 (1981) 983.
- [21] T. Matsubara and H. Matsuda: Prog. Theor. Phys. 16 (1956) 569.
- [22] H. Henkel and G. Schütz: Physica A 206 (1994) 187.
- [23] C.T. MacDonald and J.H. Gibbs and A.C. Pipkin: Biopolymers 6 (1968) 1.
- [24] C.T. MacDonald and J.H. Gibbs: Biopolymers 7 (1969) 707.
- [25] B. Derrida: Phys. Rep. 301 (1998) 65.
- [26] F.C. Alcaraz, M. Droz, M. Henkel and V. Rittenberg: Ann. Phys. 230 (1994) 250.
- [27] S. Sandow: Phys. Rev. E 50 (1994) 2660.
- [28] M. Jimbo and T. Miwa: *Algebraic analysis of solvable lattice models*. CBMS Regional Conference Series in Mathematics 85, AMS, 1993.
- [29] V. Pasquier and H. Saleur: Nuc. Phys. B330 (1990) 523.
- [30] A. Yildiz and P.R. Selvin: Trends Cell Biol. 15 (2005) 112.
- [31] A.B. Kolomeisky and M.E. Fisher: Physica A 279 (2000) 1.